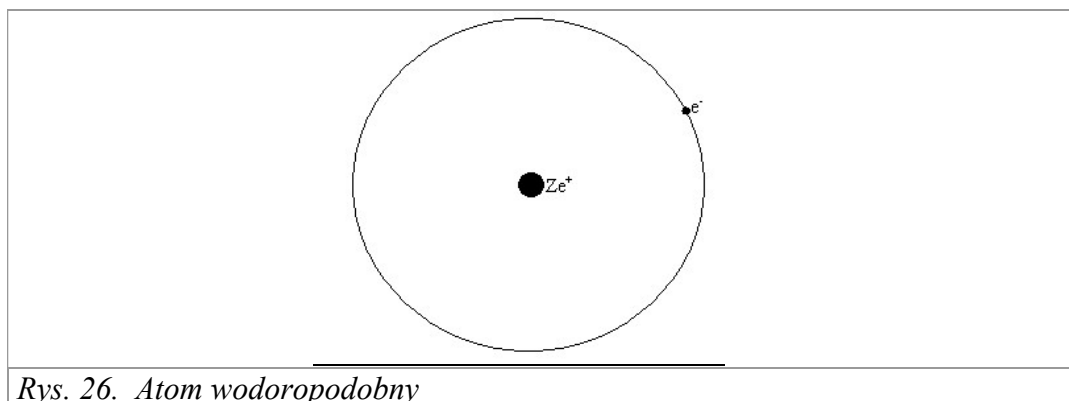


prze barierę potencjału. Po przejściu, cząstka dalej porusza się w prawo (Rys. 25), tak jak cząstka swobodna.

Z punktu widzenia mechaniki kwantowej przejście cząstki przez barierę jest analogiczne do przejścia światła przez płytkę szklaną (część światła się odbija, część przechodzi). Zjawisko tunelowe tłumaczy np. rozpad α jąder atomowych (cząstka α , składająca się z dwóch neutronów i dwóch protonów, uwalnia się z jądra, musi pokonać potencjał jądrowy).

9.4) Równanie Schrödingera dla atomu wodoropodobnego.



Rys. 26. Atom wodoropodobny

Opisem atomu wodoro-podobnego zajmowaliśmy się już przy okazji modelu Bohra. jednakże model ten jest półklasyczny i tylko przewidywane wartości energii są zgodne z doświadczeniem. Pełnego opisu takiego obiektu mikro-świata, jakim jest elektron krążący wokół jądra, dostarcza dopiero równanie Schrödingera (Równ. 40):

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U\psi$$

Przepiszmy je w równoważnej postaci:

$$0 = \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi$$

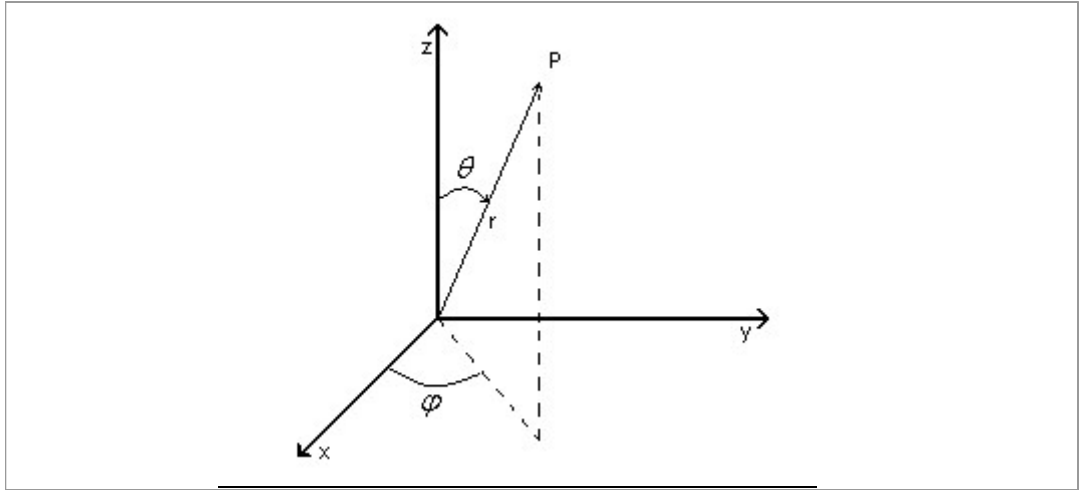
Energia potencjalną jest w naszym przypadku energia elektronu w polu elektrycznym, wytwarzanym przez jądro o ładunku Ze :

$$U = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Podstawmy ją do równania Schrödingera:

$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$	(58)
---	------

Rozważany problem posiada symetrię sferyczną (patrz Rys. 26), dlatego równanie powyższe jest o wiele łatwiej rozwiązać przechodząc od współrzędnych kartezjańskich (x,y,z) do sferycznych (r,θ,ϕ) – patrz Rys.27.



Rys. 27. Punkt (P) we współrzędnych sferycznych przedstawiony jest przez trzy współrzędne: r , φ , θ (r jest promieniem wodzącym, zaś θ i φ są dwiema współrzędnymi kątowymi).

Aby przejść do współrzędnych sferycznych w Równ. 58, trzeba wyrazić w nich Laplasjan:

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

W poradniku matematycznym znajdziemy łatwo, że Laplasjan w tych współrzędnych ma postać:

$$\Delta\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}$$

Podstawiając go do Równ. 40, otrzymujemy równanie Schrödingera dla atomu wodoru:

$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$	(59)
--	------

Rozwiązanie tego równania dokonuje się w sposób analityczny, jest ono jednak dosyć skomplikowane, dlatego też przejdziemy od razu do otrzymanego rozwiązania. Okazuje się, rozwiązanie na funkcję falową ψ można przedstawić jako:

$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$	(60)
--	------

czyli jako iloczyn trzech funkcji, z których każda zależy tylko od jednej zmiennej. I tak:

$R(r)$ - nazywamy funkcją radialną, zaś $\Theta(\theta)$ i $\Phi(\varphi)$ – funkcjami kątowymi.

Co więcej parametrami tych funkcji są trzy liczby kwantowe n, l, m , w ten sposób, że:

$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$	(61)
--	------

Wykazuje się, że te liczby kwantowe mają następującą interpretację:

n – jest główną liczbą kwantową; odpowiedzialna za energię,
 l – jest orbitalną liczbą kwantową, która odpowiada za moment pędu (kręt) elektronu,
 m – jest magnetyczną liczbą kwantową; odpowiada ona za rzut momentu pędu na wyróżniony kierunek (np. na pole magnetyczne \vec{B}).

Elektron może znajdować się w różnych stanach kwantowych. Każdy opisany jest przez n, l, m . Dodatkowo, z relatywistycznego równania Diraca wynika czwarta liczba : s (spinu, lub krętu własnego). Ma ona także swoją liczbę magnetyczną: m_s , która określa rzut krętu własnego elektronu na wybrany kierunek.

Na podstawie wielu faktów doświadczalnych Pauli sformułował następującą zasadę (zakaz Pauliego):

ZAKAZ PAULIEGO: w jednym stanie kwantowym, określonym liczbami (n, l, m, m_s) może przebywać tylko jeden elektron

Stosowanie tej zasady umożliwia przewidywanie obsadzenia kolejnych poziomów energetycznych w atomie przez elektrony.

Dopuszczalne wartości liczb kwantowych:

Poniżej wypisano, jakie wartości mogą przyjmować cztery liczby kwantowe, opisujące stany elektronu. Po prawej stronie podano, jak liczby te definiują energię (E), kręt orbitalny (L) i własny (L_s) elektronu i ich rzuty na wybrany kierunek (K i $K_{s(z)}$):

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

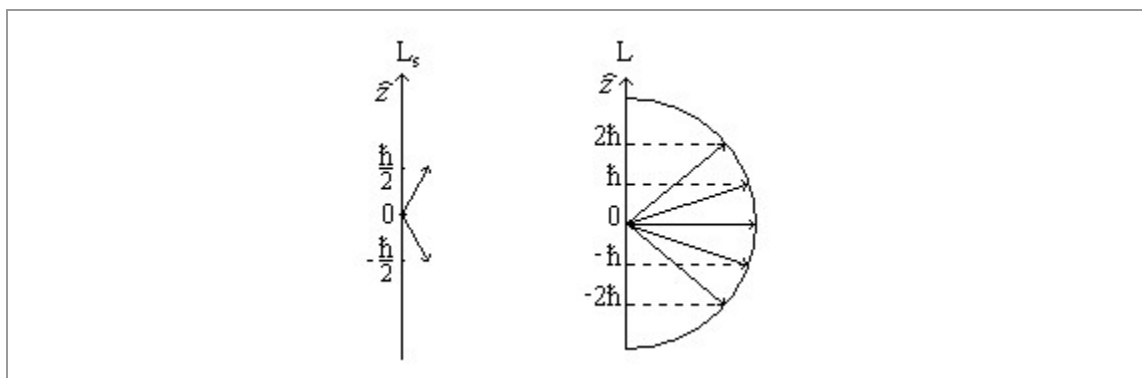
$$K_z = m\hbar$$

$$s = \frac{1}{2}$$

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$K_{s(z)} = m_s \hbar$$



Rozpiszmy teraz jakie stany (orbitale) są kolejno obsadzane w atomie wodoropodobnym. Uzyskamy je, biorąc pod uwagę dopuszczalne zakresy zmienności liczb kwantowych. Najpierw bierzemy pod uwagę liczbę n , następnie dopuszczalne wartości l , potem m , na końcu pamiętamy, że liczba m_s ma dwie możliwe wartości ($\pm \frac{1}{2}$). I tak:

dla $n=1$

$$n = 1; l = 0; m = 0; m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (2 \text{ stany ; dwa elektrony})$$

dla $n=2$

$$\left. \begin{array}{l} n = 2; l = 0; m = 0; m_s = \pm \frac{1}{2} \Big\} 2el. \\ l = 1; m = -1; m_s = \pm \frac{1}{2} \Big\} \\ m = 0; m_s = \pm \frac{1}{2} \Big\} 6el. \\ m = +1; m_s = \pm \frac{1}{2} \Big\} \end{array} \right\} 8el.$$

dla $n=3$

$$\left. \begin{array}{l}
 n = 3; l = 0 \} 2el. \\
 \quad \quad \quad l = 1 \} 6el. \\
 \left. \begin{array}{l}
 l = 2; m = 0 \\
 \quad \quad m = 1 \\
 \quad \quad m = -1 \end{array} \right\} 6el. \\
 \quad \quad \quad m = 2; m_s = \pm \frac{1}{2} \\
 \quad \quad \quad m = -2; m_s = \pm \frac{1}{2}
 \end{array} \right\} 10el.
 \end{array} \right\} 18el.$$

Wszystkie elektrony, które mają tę samą wartość n tworzą *powłokę*. Ogólnie na n -tej powłoce może znajdować się maksymalnie znajduje się $2n^2$ elektronów.

Na danej powłoce, elektrony, które mają określoną wartość l tworzą *podpowłokę*. Zgodnie z ustaloną konwencją, przyjmuje się następujące symbole podpowłok:

$l=0$ (stan s)
 $l=1$ (stan p)
 $l=2$ (stan d)
 $l=3$ (stan f)
 $l=4$ (stan g)
 ... dalej alfabetycznie

Układ okresowy

Opisany powyżej mechanizm obsadzania powłok i podpowłok atomów wyjaśnia budowę układu okresowego (tablicy Mendelejewa).